

II. AZ IMPULZUSMOMENTUM ALGEBRA ELEMEI

A. Bevezetés

A kvantummechanikában gyakran fordul elő, hogy egymással nem kommutáló mennyiségekkel, valamint azok vektoriális szorzataival kell dolgoznunk (ilyenek lesznek az általánosított impulzus momentumok). Ehhez nyújt jelentős segítséget a permutációs (Levi–Civita, Descartes tenzor) szimbólum.

$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$	Lehetőség	Megjegyzés
+1	$\varepsilon_{xyz} = \varepsilon_{yzx} = \varepsilon_{zxy}$	xyz , stb., ciklikus sorrend
-1	$\varepsilon_{xzy} = \varepsilon_{yxz} = \varepsilon_{zyx}$	yxz , stb., anticiklikus sorrend
0	minden más esetben	

A permutációs szimbólum definíciójából világos, hogy

$$\varepsilon_{ijk} = [\delta_{ix}\delta_{jy}\delta_{kz} + \delta_{iy}\delta_{jz}\delta_{kx} + \delta_{iz}\delta_{jx}\delta_{ky} - \delta_{iz}\delta_{jy}\delta_{kx} - \delta_{ix}\delta_{jz}\delta_{ky} - \delta_{iy}\delta_{jx}\delta_{kz}],$$

vagy egyszerűbben megjegyezhető módon

$$\varepsilon_{ijk} \equiv \begin{vmatrix} \delta_{ix} & \delta_{iy} & \delta_{iz} \\ \delta_{jx} & \delta_{jy} & \delta_{jz} \\ \delta_{kx} & \delta_{ky} & \delta_{kz} \end{vmatrix}.$$

Két permutációs szimbólum szorzata is egyszerűen megadható:

$$\varepsilon_{ijk} \cdot \varepsilon_{lmn} = \begin{vmatrix} \delta_{il} & \delta_{im} & \delta_{in} \\ \delta_{jl} & \delta_{jm} & \delta_{jn} \\ \delta_{kl} & \delta_{km} & \delta_{kn} \end{vmatrix}.$$

További azonosságok bizonyíthatók:

$$\varepsilon_{ijk} \cdot \varepsilon_{imn} = \delta_{jm}\delta_{kn} - \delta_{jn}\delta_{km}$$

$$\varepsilon_{ijk} \cdot \varepsilon_{ijn} = 2\delta_{kn}$$

$$\varepsilon_{ijk} \cdot \varepsilon_{ijk} = 6$$

Ennek alapján egy részecske impulzusmomentumának komponensei egy tetszőleges középpont körül: $J_i = \varepsilon_{ijk} q_j p_k$, ahol \mathbf{q} a helyvektor és \mathbf{p} a konjugált momentum, valamint az ún. Einstein-féle vagy implicit összegzési konvenciót is alkalmazzuk, mely szerint ha a kifejezésben az egyik Descartes index többször fordul elő, azt úgy kell értelmezni, mint a három Descartes index összege. Egy index maximum kétszer fordulhat elő egy szorzatban.

Ennek megfelelően

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \equiv A_x B_x + A_y B_y + A_z B_z \equiv \sum_i^{xyz} A_i B_i \equiv \mathbf{A}^T \mathbf{B}$$

az összegzési konvenció szerint egyszerűen $A_i B_i$ alakban írható fel.

Hasonlóan az összegzési konvenció szerint

$$\frac{1}{2} \boldsymbol{\omega}^T \mathbf{I} \boldsymbol{\omega} \equiv \frac{1}{2} \omega_i I_{ij} \omega_j.$$

Definíció: Bármely \mathbf{j} vektor operátort impulzus momentum operátornak nevezünk, ha annak mindhárom Descartes komponense, j_i , önadjungált operátor, továbbá azok kielégítik az alábbi alapvető kommutációs összefüggéseket:

$$[j_i, j_k] = i\hbar \varepsilon_{ikl} j_l, \quad (1)$$

ahol (i, k, l) az $(1, 2, 3) \equiv (x, y, z)$ indexek ciklikus permutációit, míg $[a, b] = ab - ba$ az a és b mennyiségek kommutátorát jelöli. A továbbiakban \mathbf{j} fogja jelölni az általánosított impulzus momentum vektort/operátort, míg például ℓ a pálya impulzus momentumot. A megszokott módon legyen továbbá $\mathbf{j}^2 = \sum_{i=1}^3 j_i^2 \equiv j_x^2 + j_y^2 + j_z^2$.

Az (1) egyenletet szokásosan az ℓ pálya impulzusmomentumokra vonatkoztatjuk, ott viszont felhasználjuk, hogy a (IV.) posztulátum szerint $[q_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$.

$$[\ell_x, \ell_y] = [q_y p_z - q_z p_y, q_z p_x - q_x p_z].$$

Ezt kifejtve

$$\begin{aligned} & q_y p_z q_z p_x - q_y p_z q_x p_z - q_z p_y q_z p_x + q_z p_y q_x p_z - \\ & q_z p_x q_y p_z + q_x p_z q_y p_z + q_z p_x q_z p_y - q_x p_z q_z p_y = \\ & q_y p_x (p_z q_z) - q_y q_x (p_z p_z) - p_y p_x (q_z q_z) + p_y q_x (q_z p_z) - \\ & p_x q_y (q_z p_z) + q_x q_y (p_z p_z) + p_x p_y (q_z q_z) - q_x p_y (p_z q_z) = \\ & q_y p_x [p_z, q_z] - q_y q_x [p_z, p_z] - p_y p_x [q_z, q_z] + p_y q_x [q_z, p_z] = \\ & -i\hbar q_y p_x + i\hbar p_y q_x = i\hbar j_z, \end{aligned}$$

ahol alkalmaztuk a $[q_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$ kvantumfeltételt (mely kielégül, ha $p_\alpha := -i\hbar \partial / \partial \alpha$).

Belátható továbbá az is, hogy $\mathbf{j} \times \mathbf{j} = i\hbar\mathbf{j}$.

Bizonyítás:

$$\begin{aligned} \mathbf{j} \times \mathbf{j} &= \mathbf{n}_i(j_y j_z - j_z j_y) + \mathbf{n}_j(j_z j_x - j_x j_z) + \mathbf{n}_k(j_x j_y - j_y j_x) = \\ &= \mathbf{n}_i[j_y, j_z] + \mathbf{n}_j[j_z, j_x] + \mathbf{n}_k[j_x, j_y] = i\hbar(\mathbf{n}_i j_x + \mathbf{n}_j j_y + \mathbf{n}_k j_z) = i\hbar\mathbf{j}, \end{aligned}$$

ahol \mathbf{n}_i , \mathbf{n}_j , és \mathbf{n}_k a Descartes-térbeli egységvektorok.

A továbbiakban gyakran a $\hbar=1$ feltételezéssel élünk (ez az impulzusmomentum atomi egysége).

Az (1) egyenlet alapján (és némi algebrai manipuláció árán) belátható, hogy \mathbf{j}^2 kommutál mindhárom j_i komponenssel:

$$[\mathbf{j}^2, j_x] = [\mathbf{j}^2, j_y] = [\mathbf{j}^2, j_z] = 0. \quad (2)$$

Ez világos és egyszerű állítás, \mathbf{j}^2 skaláris mennyiség és az orientációtól független, míg komponensei nem azok.

Bizonyítás:

$$[\mathbf{j}^2, j_z] = [j_x^2, j_z] + [j_y^2, j_z] + [j_z^2, j_z]$$

$$\begin{aligned} [j_x^2, j_z] &= j_x j_x j_z - j_z j_x j_x + (j_x j_z j_x - j_x j_z j_x) = \\ &= j_x(j_x j_z - j_z j_x) + (j_x j_z - j_z j_x)j_x = -i\hbar(j_x j_y + j_y j_x) \end{aligned}$$

Hasonlóan, $[j_y^2, j_z] = +i\hbar(j_y j_x + j_x j_y)$, és $[j_z^2, j_z] = 0$, azaz $[\mathbf{j}^2, j_z] = 0$.

Tehát olyan $|jm\rangle$ állapotokat tudunk konstruálni, melyek egyszerre sajátfüggvényei \mathbf{j}^2 -nek és \mathbf{j} bármely komponensének, az általános konvenció szerint j_z -nek, azaz

$$\mathbf{j}^2|jm\rangle = \lambda_j|jm\rangle \text{ és } j_z|jm\rangle = m|jm\rangle. \quad (3)$$

Határozzuk meg a $\lambda_j = \langle jm|\mathbf{j}^2|jm\rangle$ és $m = \langle jm|j_z|jm\rangle$ sajátértékeket.

A $j_x^2 + j_y^2 = \mathbf{j}^2 - j_z^2$ operátor diagonális a $|jm\rangle$ reprezentációban. Továbbá, pozitív szemidefinit, azaz nemnegatív sajátértékekkel rendelkezik:

$$(j_x^2 + j_y^2)|jm\rangle = (\lambda_j - m^2)|jm\rangle, \quad (4)$$

hiszen egy önadjungált (hermitikus) operátor négyzetének várható értéke, azaz egy valós sajátérték négyzete mindig nagyobb vagy egyenlő nullánál. Tehát azt a következtetést vonhatjuk le, hogy m értéke korlátos mind felülről, mind alulról úgy, hogy m^2 értéke nem haladhatja meg λ_j értékét. Tehát bármely \mathbf{j} -re léteznie kell az m_{\min} és m_{\max} értékeknek.

Vezessük most be a j_{\pm} ún. léptető [*raising* és *lowering*, létra (*ladder*), illetve eltolási (*shift*)] operátorokat, melyek az impulzuszórában központi jelentőséggel bírnak majdani számolásaink során:

$$j_+ = j_x + ij_y \text{ és } j_- = j_x - ij_y \quad (5)$$

Fontos megjegyezni, hogy míg a j_x, j_y és j_z operátorok maguk önadjungáltak, a léptető operátorok nem önadjungáltak (ez nyilván így van, hiszen ők egymás adjungáltjai). Megmutatható, hogy kielégülnek az alábbi, a léptető operátorokra vonatkozó kommutációs szabályok:

$$[\mathbf{j}^2, j_{\pm}] = 0, \quad (6a)$$

Bizonyítás:

$$[\mathbf{j}^2, j_{\pm}] = [\mathbf{j}^2, j_x \pm ij_y] = [\mathbf{j}^2, j_x] \pm i[\mathbf{j}^2, j_y] = 0.$$

Továbbá,

$$(j_x \mp ij_y)(j_x \pm ij_y) = j_x^2 + j_y^2 \pm i[j_x, j_y] = j_x^2 + j_y^2 \mp \hbar j_z = j^2 - j_z^2 \mp \hbar j_z \text{ és}$$

$$0 \leq |j_{\pm}|jm\rangle|^2 = \langle jm|j_{\mp}j_{\pm}|jm\rangle = \langle jm|j^2 - j_z^2 \mp \hbar j_z|jm\rangle = (\lambda_j - m^2 \mp m)\hbar^2, \text{ azaz } \lambda_j \geq m(m \pm 1).$$

$$[j_z, j_{\pm}] = \pm j_{\pm}, \quad (6b)$$

Bizonyítás:

$$[j_z, j_{\pm}] = [j_z, j_x \pm ij_y] = [j_z, j_x] \pm i[j_z, j_y] = ij_y \pm i(-ij_x) = \pm(j_x \pm ij_y) = \pm j_{\pm}$$

$$j_{\mp} j_{\pm} = \mathbf{j}^2 - j_z(j_z \pm 1) \quad (6c)$$

Bizonyítás:

$$\begin{aligned} j_+ &= j_x + ij_y; \quad j_- = j_x - ij_y \\ j_{\mp} j_{\pm} &= (j_x \mp ij_y)(j_x \pm ij_y) = j_x^2 \pm ij_x j_y \mp ij_y j_x + j_y^2 = \\ &= j_x^2 + j_y^2 \pm i(j_x j_y - j_y j_x) = j_x^2 + j_y^2 \pm i[j_x, j_y] = \\ j_x^2 + j_y^2 \mp j_z &= j_x^2 + j_y^2 + j_z^2 - j_z^2 \mp j_z = \mathbf{j}^2 - j_z(j_z \pm 1) \end{aligned}$$

és

$$[j_+, j_-] = 2j_z. \quad (6d)$$

Vizsgáljuk a $j_{\pm}|jm\rangle$ függvény viselkedését. Azt találjuk, hogy

$$\mathbf{j}^2 j_{\pm}|jm\rangle = j_{\pm} \mathbf{j}^2 |jm\rangle = \lambda_j j_{\pm}|jm\rangle, \quad (7)$$

hiszen a két operátor felcserélhető egymással (ld. (6a)).

Továbbá,

$$j_z j_{\pm}|jm\rangle = (m \pm 1) j_{\pm}|jm\rangle. \quad (8)$$

Bizonyítás:

$$\begin{aligned} j_z j_{\pm}|jm\rangle &= \{j_z j_{\pm} + j_{\pm} j_z - j_{\pm} j_z\}|jm\rangle = \{[j_z, j_{\pm}] + j_{\pm} j_z\}|jm\rangle = \\ &= \{\pm j_{\pm} + j_{\pm} j_z\}|jm\rangle = (m \pm 1) j_{\pm}|jm\rangle \end{aligned}$$

Tehát $j_{\pm}|jm\rangle$ \mathbf{j}^2 -nek sajátfüggvénye λ_j sajátértékkel, és egyben j_z -nek is sajátfüggvénye $m \pm 1$ sajátértékkel. Tehát $j_{\pm}|jm\rangle$ arányos a $|jm \pm 1\rangle$ normált sajátfüggvénnyel,

$$j_{\pm}|jm\rangle = C_{\pm}|jm \pm 1\rangle. \quad (9)$$

Tehát lényegileg úgy vehetjük a j_+ és j_- operátorokat, mint amelyek egy egységgel, azaz a következő megengedett orientációra tudják megváltoztatni egy általános impulzus momentum vektor térbeli orientációját. Így most már érthető a léptető operátor elnevezés.

Mint hogy az m értékek a korábban tárgyaltak alapján korlátosak, így egyből felírhatjuk, hogy

$$j_+|jm_{\max}\rangle = 0 \text{ és } j_-|jm_{\min}\rangle = 0. \quad (10)$$

Ha (10a)-ra a j_- , míg (10b)-re a j_+ léptető operátor hat, valamint a

$$j_{\mp}j_{\pm} = \mathbf{j}^2 - j_z(j_z \pm 1) \quad (11)$$

azonosságot alkalmazzuk, úgy két egyenletet kapunk:

$$\lambda_j - m_{\max}(m_{\max} + 1) = 0 \text{ és } \lambda_j - m_{\min}(m_{\min} - 1) = 0. \quad (12)$$

A két egyenlet átalakításával, λ_j kiküszöbölésével azt kapjuk, hogy

$$(m_{\max} + m_{\min})(m_{\max} - m_{\min} + 1) = 0. \quad (13)$$

Mint hogy $m_{\max} \geq m_{\min}$, egyetlen lehetőségünk (13) megoldására az, hogy

$$m_{\max} = -m_{\min}. \quad (14)$$

Az m egymás utáni értékei 1 egységgel térnek el. Tehát $m_{\max} - m_{\min}$ pozitív egész, $m_{\max} - m_{\min} = K$, (13) alakja: $(2m_{\min} + K)(K + 1) = 0$, azaz $m_{\min} = -K/2$. Legyen tehát $K = 2j$, ahol j egész vagy félegész szám lehet. Ekkor azt írhatjuk, hogy

$$m_{\max} = j \text{ és } m_{\min} = -j, \quad (15)$$

valamint m $2j + 1$ lehetséges értéket vehet fel. (15)-nak (12)-be történő helyettesítésével adódik a további eredmény, miszerint

$$\lambda_j = j(j + 1). \quad (16)$$

Most már ki tudjuk számítani a C_{\pm} arányossági tényezőket:

$$|C_{\pm}^2| = \langle jm | j_{\mp} j_{\pm} | jm \rangle = \langle jm | \mathbf{j}^2 - j_z(j_z \pm 1) | jm \rangle = j(j + 1) - m(m \pm 1) \quad (17)$$

Ebből a kifejezésből az látható, hogy míg C_{\pm} abszolút értéke jól meghatározott, addig fázisa tetszőleges. Válasszuk C_{\pm} -t valós értékűnek:

$$C_{\pm} = [j(j+1) - m(m \pm 1)]^{1/2} \quad (18)$$

Ez a választás megegyezik a vegyészek által megszokott fázis konvencióval, miszerint $j_x |jm\rangle$ reprezentációbeli mátrix elemei valósak, míg j_y mátrix elemei tisztán képzetesek.

Összefoglalás

(1) Megállapíthatjuk, hogy a j impulzusmomentum kvantumszám felveheti a $0, 1/2, 1, 3/2, 2, \dots$ (félegész) értékeket \hbar egységben számolva. A j kvantumszám egész értékei az ℓ pálya impulzusmomentumnak, míg a j kvantumszám félegész értékei a spin impulzusmomentumnak felelnek meg. A kommutációs tulajdonság a pálya és spin impulzusmomentumok egységes tárgyalását tette lehetővé.

(2) Az általánosított impulzusmomentum operátorok (j_x, j_y, j_z, j_+, j_- , és \mathbf{j}^2) mátrix elemei a $|jm\rangle$ reprezentációban:

$$\langle jm | \mathbf{j}^2 | j'm' \rangle = j(j+1) \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad (19)\mathbf{M}$$

$$\langle jm | j_z | j'm' \rangle = m' \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad (20)\mathbf{M}$$

$$\langle jm | j_{\pm} | j'm' \rangle = [j(j+1) - m'(m' \pm 1)]^{1/2} \delta_{jj'} \delta_{m, m' \pm 1} \quad (21)\mathbf{M}$$

$$\langle jm | j_x | j'm' \rangle = \frac{1}{2} [j(j+1) - m'(m' \pm 1)]^{1/2} \delta_{jj'} \delta_{m, m' \pm 1} \quad (22)\mathbf{M}$$

$$\langle jm | j_y | j'm' \rangle = \mp \frac{1}{2} i [j(j+1) - m'(m' \pm 1)]^{1/2} \delta_{jj'} \delta_{m, m' \pm 1} \quad (23)\mathbf{M}$$

A két utolsó összefüggés alternatív felírása:

$$\langle jm \pm 1 | j_x | jm \rangle = \frac{1}{2} [(j \mp m)(j \pm m + 1)]^{1/2} \quad (24a)$$

$$\langle jm \pm 1 | j_y | jm \rangle = \mp \frac{1}{2} i [(j \mp m)(j \pm m + 1)]^{1/2} \quad (24b)$$

(3) Megjegyzendő, hogy a jelenlegitől eltérő fáziskonvenció alkalmazása esetén a \pm jelek \mp -ra változhatnak (24) jobb oldalán.

Például $j = 2$ esetén az alábbi mátrixokat kapjuk:

$$j_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \sqrt{3/2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3/2} & 0 & \sqrt{3/2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3/2} & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$j_y = \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & -\sqrt{3/2}i & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3/2}i & 0 & -\sqrt{3/2}i & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3/2}i & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & i & 0 \end{bmatrix}$$

$$j_z = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \end{bmatrix}$$

$$j_+ = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad j_- = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{j}^2 = \begin{bmatrix} 6 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 6 \end{bmatrix}.$$

B. Impulzusmomentum hullámfüggvények

Az eddigiekben a $|jm\rangle$ impulzusmomentum sajátfüggvényeket egy $2j+1$ dimenziós absztrakt vektortérben tekintettük. A j kvantumszám egész(!) értékeire, melyeket ℓ -lel jelölünk (hogy megteremtsük a kapcsolatot a pálya impulzusmomentummal), gyakran érdemes gömbi polár koordinátákban dolgozni.

Gömbi polár koordináták:

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi & r^2 &= x^2 + y^2 + z^2 \\ y &= r \sin \theta \sin \phi & \cos \theta &= z / r \\ z &= r \cos \theta & \tan \phi &= y / x \end{aligned}$$

Az ℓ impulzusmomentum operátor komponensei ekkor a következő alakot veszik fel ($\hbar = 1$):

$$\ell_x = i \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (25a)$$

$$\ell_y = i \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (25b)$$

$$\ell_z = -i \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (25c)$$

Bizonyítás:

A szükséges parciális deriváltak:

$$\left(\frac{\partial r}{\partial x} \right)_{y,z} = \sin \theta \cos \phi = \frac{x}{r} \quad \left(\frac{\partial r}{\partial y} \right)_{x,z} = \sin \theta \sin \phi = \frac{y}{r} \quad \left(\frac{\partial r}{\partial z} \right)_{x,y} = \cos \theta = \frac{z}{r}$$

$$\left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)_{y,z} = \frac{\cos \theta \cos \phi}{r} \quad \left(\frac{\partial \theta}{\partial y} \right)_{x,z} = \frac{\cos \theta \sin \phi}{r} \quad \left(\frac{\partial \theta}{\partial z} \right)_{x,y} = -\frac{\sin \theta}{r}$$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{y,z} = -\frac{\sin \phi}{r \sin \theta} \quad \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_{x,z} = \frac{\cos \phi}{r \sin \theta} \quad \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)_{x,y} = 0$$

hiszen például $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$ segítségével

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \cdot 2x = \frac{r \sin \theta \cos \phi}{r} = \sin \theta \cos \phi$$

A felírt kifejezések alapján

$$\begin{aligned} \ell_x &= -i \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) = -i \left[\begin{aligned} &r \sin \theta \sin \phi \left(\frac{\partial r}{\partial z} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) - \\ &r \cos \theta \left(\frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \end{aligned} \right] = \\ &-i \left[\begin{aligned} &r \sin \theta \sin \phi \left(\cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \\ &r \cos \theta \left(\sin \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \sin \phi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \end{aligned} \right] = \\ &i \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \end{aligned}$$

és hasonlóan a további két komponensre.

A komponensek ismeretében felírhatjuk, hogy

$$\boxed{\ell_{\pm} = \exp(\pm i\phi) \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)} \quad (26)$$

Bizonyítás:

$$\begin{aligned} \ell_{\pm} &= \ell_x \pm i \ell_y = i \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \mp \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) = \\ &\frac{\partial}{\partial \theta} (i \sin \phi \pm \cos \phi) + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} (i \cos \phi \mp \sin \phi) = \exp(\pm i\phi) \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \end{aligned}$$

és

$$\boxed{\ell^2 = - \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right]} \quad (24)$$

Bizonyítás:

$$\ell^2 = \ell_x^2 + \ell_y^2 + \ell_z^2 = \dots$$

Ebben a reprezentációban a szokásos sajátérték problémák,

$$\ell^2 |\ell m\rangle = \ell(\ell + 1) |\ell m\rangle \quad (27a)$$

és

$$\ell_z |\ell m\rangle = m |\ell m\rangle \quad (27b)$$

két parciális differenciálegyenletet (PDE) eredményeznek, melyek megoldásfüggvényei az un. gömbharmonikus függvények:

$$|\ell m\rangle \equiv Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \Theta_{\ell m}(\theta) \Phi_m(\phi) . \quad (28)$$

A $\Phi_m(\phi)$ függvény kielégíti a $\left(\frac{d^2}{d\phi^2} + m^2\right)\Phi_m(\phi) = 0$ közösleges differenciálegyenletet (ODE, homogén Helmholtz-egyenlet) és explicit alakja

$$\Phi_m(\phi) = (2\pi)^{-1/2} \exp(im\phi) . \quad (29)$$

Az így definiált $\Phi_m(\phi)$ függvények ortonormáltak:

$$\int_0^{2\pi} \Phi_m^*(\phi) \Phi_{m'}(\phi) d\phi = \delta_{mm'} . \quad (30)$$

A $\Theta_{\ell m}(\theta)$ függvények az alábbi ODE-t elégítik ki:

$$\left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d}{d\theta} \right) + \ell(\ell + 1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right] \Theta_{\ell m}(\theta) = 0 , \quad (31)$$

melynek csak egész m -ekre van megoldása, $m \geq 0$ esetén az explicit alak

$$\Theta_{\ell m}(\theta) = \frac{(-1)^m}{2^\ell \ell!} \left[\frac{2\ell + 1}{2} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!} \right]^{1/2} (\sin\theta)^m \left[\frac{d}{d(\cos\theta)} \right]^{\ell+m} (\cos^2\theta - 1)^\ell . \quad (32)$$

Az így definiált $\Theta_{\ell m}(\theta)$ függvények ortonormáltak az alábbiak szerint:

$$\int_0^\pi \Theta_{\ell m}^*(\theta) \Theta_{\ell' m'}(\theta) \sin\theta d\theta = \delta_{\ell\ell'} . \quad (33)$$

Az egységgömb felszínén az $Y_{\ell m}$ függvényekre ki lehet mondani, hogy

$$\langle Y_{\ell m} | Y_{\ell' m'} \rangle = \langle \Theta_{\ell m} | \Theta_{\ell' m'} \rangle \langle \Phi_m | \Phi_{m'} \rangle = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} .$$

Bizonyos gyakorlati alkalmazások során célszerű kihasználni a gömb-harmonikusok Θ -függő tagja és a P_ℓ^m asszociált Legendre-polinomok kapcsolatát:

$$\Theta_{\ell m}(\theta) = (-1)^m \left[\frac{2\ell + 1}{2} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!} \right]^{1/2} P_\ell^m(\cos \theta), \quad (34)$$

ahol

$$P_\ell(\cos \theta) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \left[\frac{d}{d(\cos \theta)} \right]^\ell (\cos^2 \theta - 1)^\ell \quad (35a)\mathbf{M}$$

és

$$P_\ell^m(\cos \theta) = \sin^m \theta \left[\frac{d}{d(\cos \theta)} \right]^m P_\ell(\cos \theta). \quad (35b)\mathbf{M}$$

A (32) és (34) kifejezések $m \geq 0$ esetén állnak fenn. Negatív m -ekre választásunk szerint $\Theta_{\ell, -|m|} = (-1)^m \Theta_{\ell|m|}$, azaz a (30) és (32) kifejezések továbbra is igazak, de m helyébe $|m|$ -t kell írni, míg a $(-1)^m$ faktort el kell hagyni, hiszen $(-1)^m (-1)^m = 1$. Továbbá,

$$Y_{\ell, m}^*(\theta, \phi) = (-1)^m Y_{\ell, -m}(\theta, \phi). \quad (36)$$

Bizonyítás:

$$Y_{\ell m}^*(\theta, \phi) = [\Theta_{\ell m}(\theta) \Phi_m(\phi)]^* = \Theta_{\ell m}(\theta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-im\phi} = \Theta_{\ell m}(\theta) \Phi_{-m}(\phi),$$

ahol felhasználtuk, hogy $\Theta_{\ell m}(\theta)$ valós. A választott konvenció szerint ekkor nyilvánvaló, hogy $m > 0$ és $m < 0$ esetére is

$$\Theta_{\ell m}(\theta) = (-1)^m \Theta_{\ell -m}.$$

Az itt megadott két kifejezés felhasználásával

$$Y_{\ell m}^*(\theta, \phi) = \Theta_{\ell m}(\theta) \Phi_{-m}(\phi) = (-1)^m \Theta_{\ell -m}(\theta) \Phi_{-m}(\phi) = (-1)^m Y_{\ell -m}(\theta, \phi)$$

Az első néhány gömbharmonikus függvény:

$$\begin{aligned}
 Y_{00}(\theta, \phi) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\
 Y_{10}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} \\
 Y_{1,\pm 1}(\theta, \phi) &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \exp(\pm i\phi) \sin \theta = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{(x \pm iy)}{r} \\
 Y_{20}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) = \mp \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \frac{2z^2 - x^2 - y^2}{r^2} \\
 Y_{2,\pm 1}(\theta, \phi) &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \exp(\pm i\phi) \cos \theta \sin \theta = \mp \sqrt{\frac{15}{16\pi}} \frac{(x \pm iy)z}{r^2} \\
 Y_{2,\pm 2}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \exp(\pm 2i\phi) \sin^2 \theta = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} \frac{(x \pm iy)^2}{r^2}
 \end{aligned}$$

A gömbharmonikusok a teljes térszögtartományon ortonormált sorozatot alkotnak:

$$\langle \ell m | \ell' m' \rangle = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_{\ell m}^*(\theta, \phi) Y_{\ell' m'}(\theta, \phi) = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}. \quad (37)$$

Amennyiben $m = m' = 0$, úgy természetesen (ld. a (28), (29) és (34) egyenleteket) a Legendre-polinomokra vonatkozó ortonormalitási feltételt kapjuk vissza:

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta P_\ell(\cos \theta) P_{\ell'}(\cos \theta) = \frac{2}{2\ell + 1} \delta_{\ell\ell'}. \quad (38)$$

Vegyük észre, hogy az exponenciális függvények szorzási szabálya miatt $Y_{\ell m}^* Y_{\ell m}$ független ϕ -től. Ez természetes módon vezet el az ℓ operátornak megfeleltethető fizikai mennyiség vektorának geometriai interpretációjához, miszerint amikor a rendszer az $|\ell m\rangle$ állapotban van, akkor a vektort a z tengelyre vetítve m állandó nagyságú projekciót kapunk.

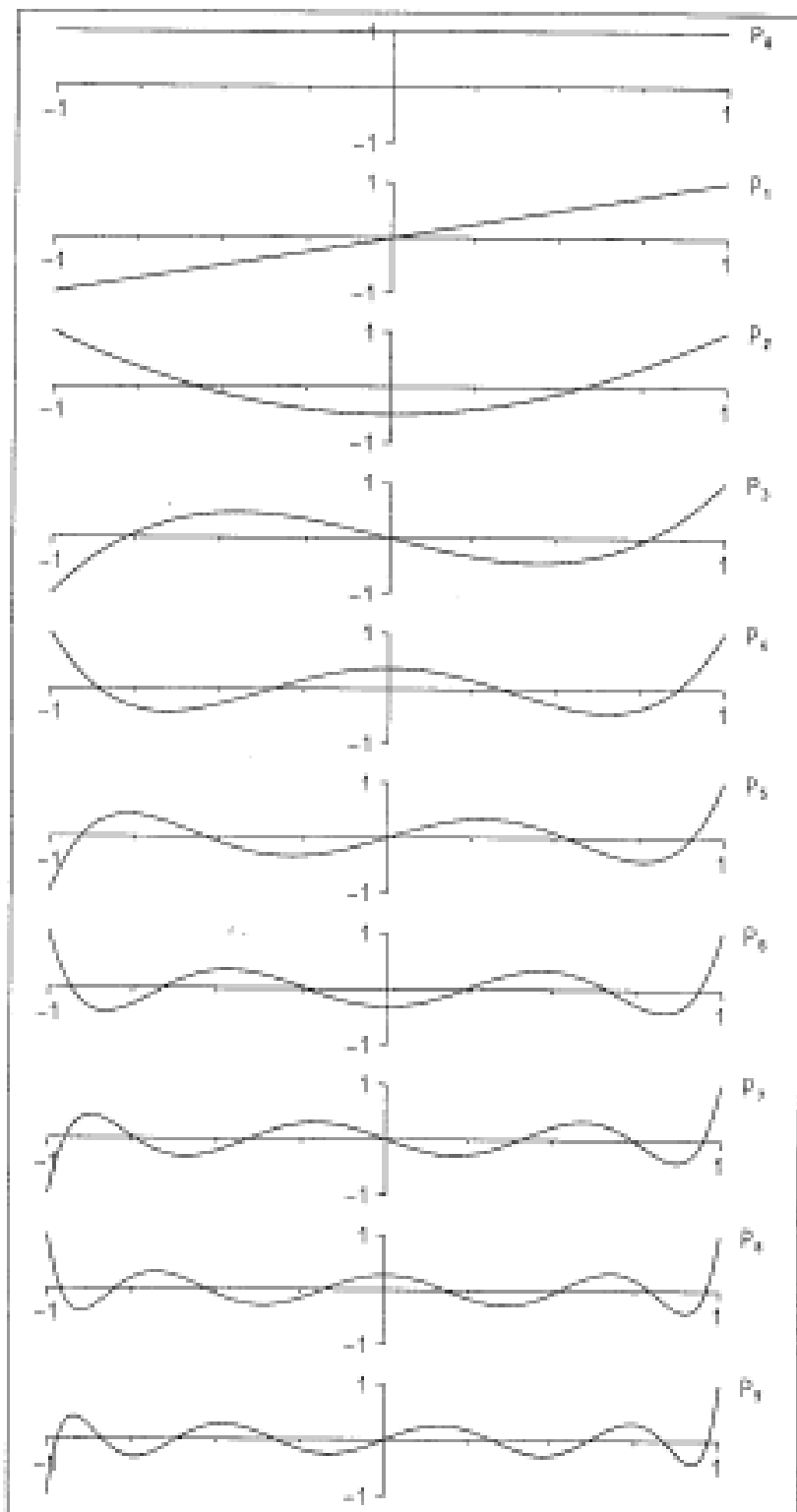


Fig. 10.3. The first ten Legendre polynomials $P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} [(x^2 - 1)^l]$.

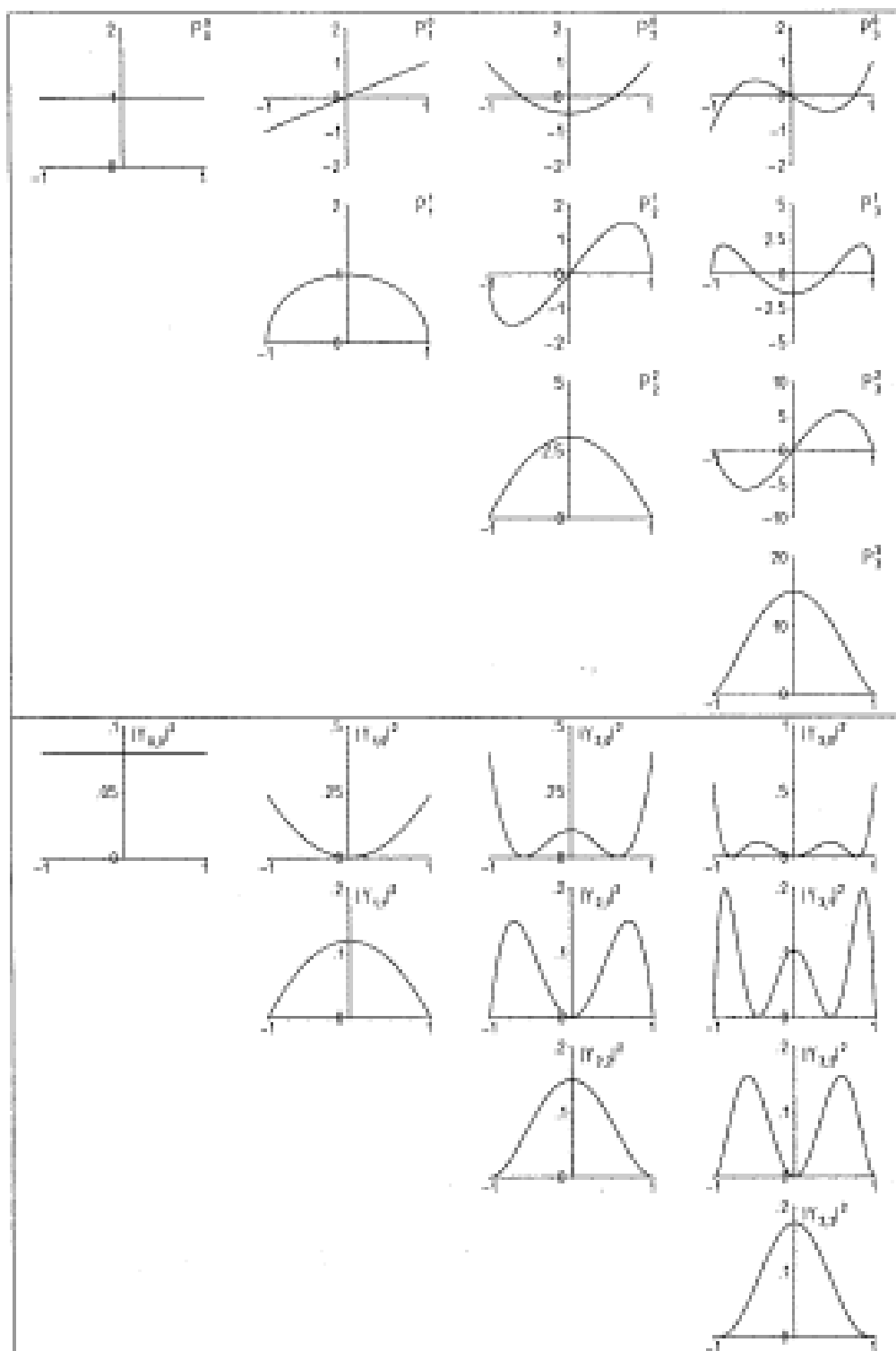


Fig. 10.4. Graphs of the associated Legendre functions $P_l^m(x)$, top, and of the absolute squares of the spherical harmonics $Y_{lm}(\theta, \phi)$, bottom. Except for a normalization factor, the absolute squares of the spherical harmonics are the squares of the associated Legendre functions.

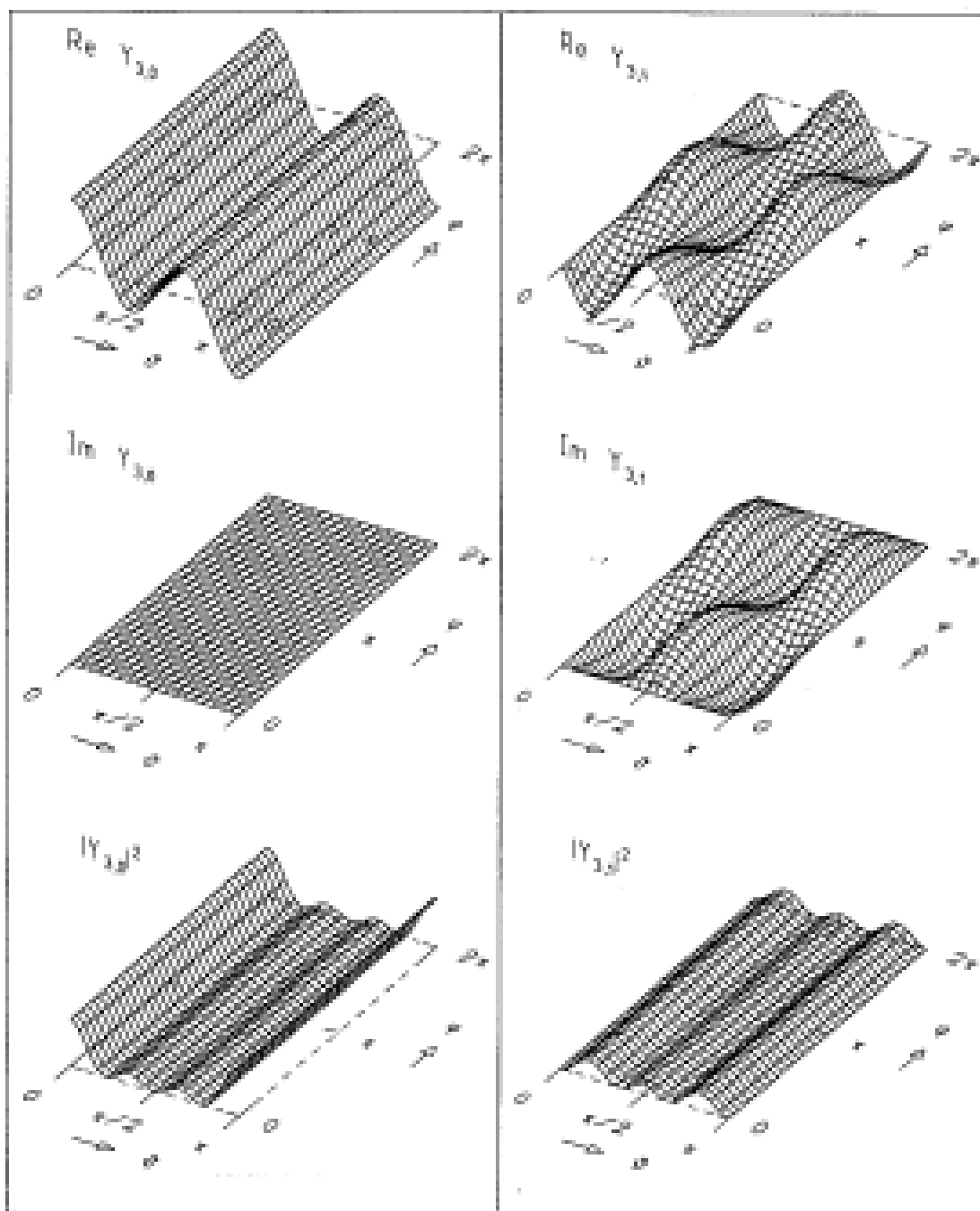


Fig. 10.5. The spherical harmonics $Y_{\ell m}$ are complex functions of the polar angle θ , with $0 \leq \theta \leq \pi$, and the azimuth ϕ , with $0 \leq \phi < 2\pi$. They can be visualized by showing their real and imaginary parts and their absolute square over the θ, ϕ plane. Such graphs are shown here for $\ell = 3$ and $m = 0, 1, 2, 3$.

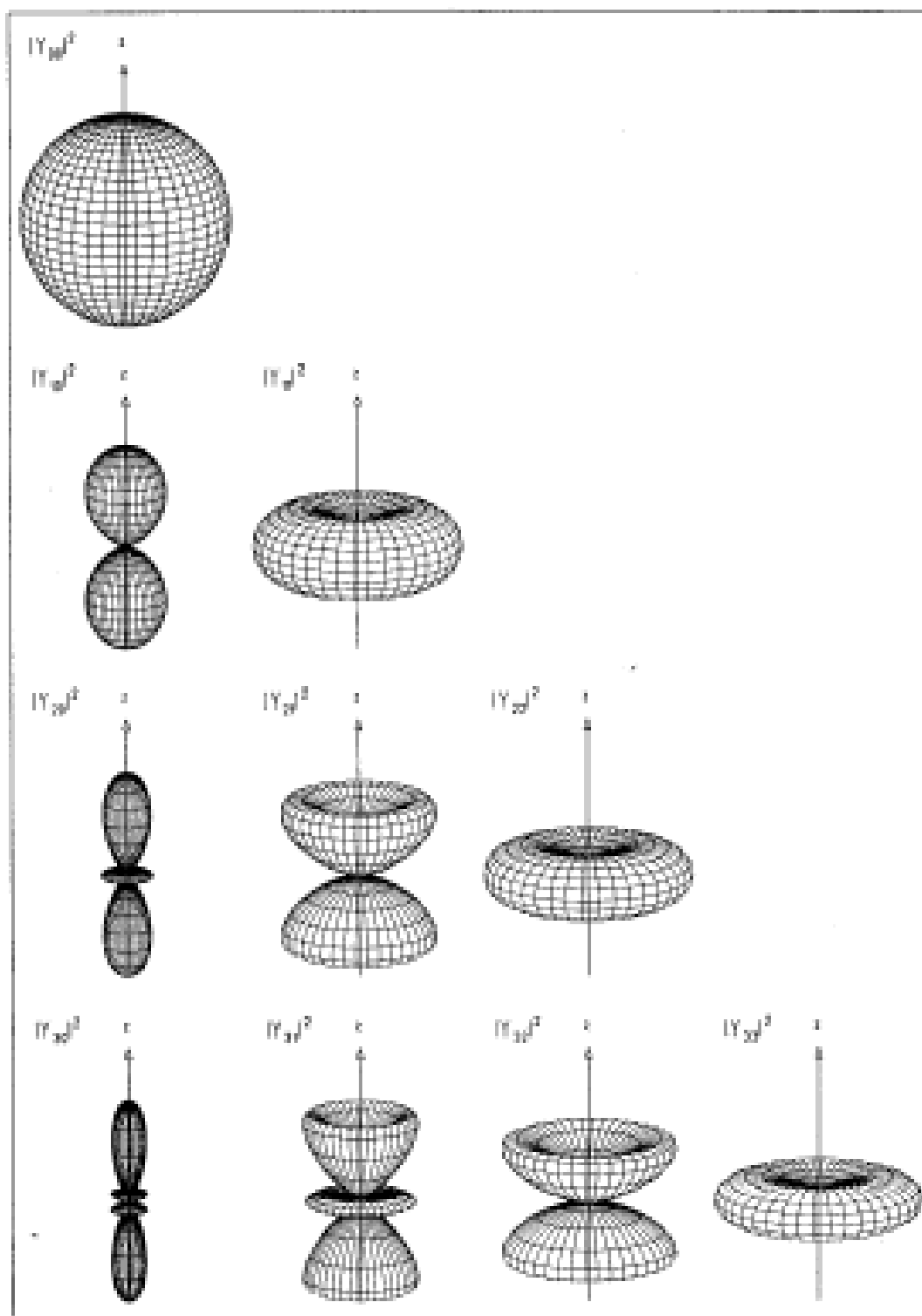


Fig. 10.6. Polar diagrams of the absolute squares of the spherical harmonics. The distance from the origin of the coordinate system to a point on the surface seen under the angles ϑ and ϕ is equal to $|Y_{lm}(\vartheta, \phi)|^2$. Different scales are used for the individual parts of the figure.

Mi a helyzet a j (és m) kvantumszámok félegész értékeire?

Belátható, hogy ebben az esetben nem lehetséges a $|jm\rangle$ bázisvektorok kifejezése az egységgömbön definiált egyértékű folytonos függvények segítségével. Azonban fel lehet építeni a $|jm\rangle$ függvényeket a $j = 1/2$ -re vonatkozó spin sajátvektorokból, melyeket hagyományosan α -val ill. β -val jelölünk:

$$\alpha = \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ és } \beta = \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (39)$$

A mátrixelemekre vonatkozó formuláink segítségével könnyen meg lehet mutatni, hogy félegész j értékekre a j_x , j_y és j_z impulzusmomentum operátorok reprezentálhatók az alábbi 2×2 -es mátrixok segítségével:

$$j_x = \frac{1}{2} \sigma_x^P = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad j_y = \frac{1}{2} \sigma_y^P = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad j_z = \frac{1}{2} \sigma_z^P = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (40)$$

ahol σ_x^P , σ_y^P és σ_z^P az ún. Pauli-féle spinmátrixok. Természetesen a Pauli-féle spinmátrixok kielégítik az alábbi összefüggéseket:

$$\text{Tr} \sigma_i^P, (\sigma_i^P)^2 = \mathbf{I} \text{ és } \sigma_i^P \sigma_k^P = -\sigma_k^P \sigma_i^P = i \sigma_l^P, \quad (41)$$

ahol $(i, k, l) = (1, 2, 3)$ a három Descartes koordináta megfelelő ciklikus permutációja, és így kielégítik az általánosított impulzusnyomatékokra vonatkozó kommutációs összefüggéseket. Továbbá azt is elvárhatjuk a korábbi tárgyalás alapján, hogy

$$j_+ = j_x + ij_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (42)$$

és

$$j_- = j_x - ij_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (43)$$

ezt majd lásd később.

Az így definiált operátorokkal könnyen tudunk számolni:

$$j_x \alpha = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \beta, \quad (44a)$$

és

$$j_z \alpha = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \alpha. \quad (44b)$$

Megjegyzendő, hogy a Dirac-féle relativisztikus kvantumkémiaiában fellépő 4×4 -es mátrixok ugyanezen operátor összefüggéseket elégítik ki, és az alábbi módon definiálhatók:

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}^P & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma}^P \end{pmatrix}. \quad (45)$$

A hasonlóan 4×4 -es négy darab Dirac-mátrixot (sajnálatos módon ezek jelölésére is α -t és β -t szokás használni, ezek a három α és β) a következő összefüggések adják meg:

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma}_i^P \\ \boldsymbol{\sigma}_i^P & \mathbf{0} \end{pmatrix} \text{ és } \beta = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{I} \end{pmatrix}. \quad (46)$$

Az α és β sajátfüggvényeket előfordul, hogy spinoroknak nevezik, bár inkább a relativisztikus kvantumkémiaiában előforduló egy oszlopból és négy sorból álló hullámfüggvényeket (melyekre a 4×4 -es Dirac-mátrixok hatnak) szokás Dirac-spinoroknak nevezni. Például, ha

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix}, \text{ akkor } \alpha_2 u = i \begin{pmatrix} -u_4 \\ u_3 \\ -u_2 \\ u_1 \end{pmatrix}. \quad (47)$$

Visszatérve eredeti tárgyalásunkra, a megadott definíciókból az is következik, hogy

$$j_+ = j_x + ij_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (48a)$$

Bizonyítás:

$$\begin{aligned} j_x + ij_y &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + i \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$j_- = j_x - ij_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (48b)$$

Bizonyítás:

$$j_x - ij_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - i \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{j}^2 = j_x^2 + j_y^2 + j_z^2 = j_z^2 - j_z + j_+ j_- = \frac{3}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (48c)$$

Bizonyítás:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \\ &= -\frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3/4 & 0 \\ 0 & 3/4 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

C. A vektor modell (Sommerfeld, 1916)

A \mathbf{j} általánosított impulzusmomentum vektor soha nem mutathat pontosan a z tengely (az ún. kvantálási tengely) irányába (semmilyen irányba nem mutathat pontosan). A $\langle j_z \rangle = m$ a maximális értéket akkor veszi fel, amikor $m = +j$. Ellenben a \mathbf{j} vektor hosszára fennáll, hogy $(\mathbf{j} \cdot \mathbf{j})^{1/2} = \langle \mathbf{j}^2 \rangle^{1/2} = [j(j+1)]^{1/2} > m$. Ez a tény összhangban van azzal az állítással, hogy j_x és j_y komponensek értékét nem lehet pontosan meghatározni. Ellenben, ha \mathbf{j} naggyá válik, úgy \mathbf{j}^2 sajátértéke, melyet $j^2(1+1/j)$ alakban is írhatunk, közel j^2 lesz. Az $1/j$ tag megjelenése tisztán kvantummechanikai effektus, és az impulzusnyomaték vektor mindhárom komponensének egyidejű meghatározhatatlanságát mutatja.

Fogalmazzuk meg kvantitatívan a fenti állítást. Az \mathbf{A} önadjungált operátorral jellemzett A fizikai mennyiség mérésének bizonytalanságát A varianciájával,

$$(\Delta A)^2 = \langle (\mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle)^2 \rangle = \langle \mathbf{A}^2 \rangle - \langle \mathbf{A} \rangle^2 \quad (49)$$

jellemezzük. Szokás A varianciájának, ΔA -nak pozitív négyzetgyökét A szórásának nevezni. Olyan reprezentációban, mely diagonalizálja \mathbf{A} -t, $(\Delta A)^2$ eltűnik és A bizonytalanság nélkül, elvileg tetszőleges pontossággal meghatározható.

Tekintsük a j_x és j_y mennyiségek varianciáját a $|jm\rangle$ állapotban. A j_x -re és j_y -ra vonatkozó mátrixelemek (ld. korábbi egyenleteket) alapján $\langle j_x \rangle = \langle j_y \rangle = 0$, azaz $(\Delta j_x)^2 = \langle j_x^2 \rangle$ és $(\Delta j_y)^2 = \langle j_y^2 \rangle$. Tehát a $\langle \mathbf{j}^2 \rangle = \langle j_x^2 \rangle + \langle j_y^2 \rangle + \langle j_z^2 \rangle$ azonosság alapján

$$(\Delta j_x)^2 + (\Delta j_y)^2 = j(j+1) - m^2, \quad (50)$$

azaz (1) a varianciák összege állandó valamely meghatározott m értékre; és (2) a varianciák összege a minimumát $|m| = j$ -re éri el.

Ezek a megfigyelések adják az alapját az impulzusmomentum vektor klasszikus modelljének, amikor a $|jm\rangle$ sajátállapotot egy $\sqrt{j(j+1)}$ hosszúságú \mathbf{j} vektor jelenít meg, mely a z tengely (a kvantálási tengely) körül precesszál, miközben a tengelyre való vetülete állandó hosszúságú.

Ezt a képet jól mutatja a következő ábra:

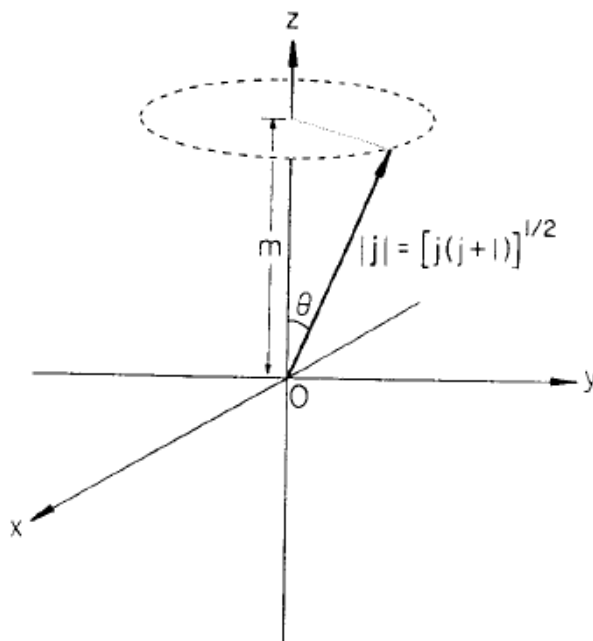


FIGURE 1.1 Vector model for the state $|jm\rangle$, which is represented by a vector \mathbf{j} precessing about the axis of quantization (the z axis) making a constant projection m on it.

A vektor modell szerint a \mathbf{j} vektor mozgása egyenletes, azaz ugyanannyi időt tölt pl. a $+x$ mint a $-x$ irányban. Erre szükség is van, hiszen ez biztosítja, hogy $\langle j_x \rangle = \langle j_y \rangle = 0$ fennálljon. Azaz j egész értékeire egy klasszikus pályát rendelünk a $|jm\rangle$ sajátállapothoz, azaz az $|\ell m\rangle$ állapothoz. Természetesen a bizonytalansági elv miatt ezt a klasszikus képet nem szabad szó szerint venni.